

Posudek bakalářské práce Karla Šindelky
Computer simulations of conformational behavior of block copolymers
in selective solvents
Počítačové simulace konformačního chování blokových kopolymerů
v selektivních rozpouštědlech

Problematika konformačního a asociačního chování polyelektrolytových kopolymerů ve vodných roztocích je aktuální, důležitá a velmi komplikovaná. Vzhledem k potenciálně významným aplikacím v celé řadě oblastí, je jí v současnosti věnována velká pozornost.

V rámci své bakalářské práce napsal pan Šindelka původní počítačový program, který umožňuje simulovat chování neutrálních polymerů ve vodných roztocích metodou dissipativní částicové dynamiky (DPD). DPD metoda umožňuje studovat nejenom konformační chování ale i spontánní asociace polymerů v roztocích. Máme v plánu program doplnit o elektrostatické interakce a použít jej v rámci diplomové práce pro studium asociace lineárního polyelektrolytového kopolymeru se surfaktanty ve vodném prostředí pro různé hodnoty koncentrace polymeru, iontové síly a pH. Protože se jedná o nový program, bylo nejdříve nutné ověřit jeho správnost. Pan Šindelka provedl dvě nezávislé studie chování známých systémů. U lineárního homogenního řetězce se panu Šindelkovi podařilo ověřit známý škálovací koeficient. U asociací lineárních krátkých kopolymerů v selektivním rozpouštědle se mu podařilo zreprodukovat distribuční funkci agregačních čísel.

Třetí část jeho bakalářské práce už obsahuje přípravné simulace pro práci diplomovou. Jedná se o studii konformačního chování dlouhého kopolymerního řetězce v selektivním rozpouštědle, při které byly parametry nastaveny tak, aby simulovaný systém co nejlépe popisoval chování blokového kopolymeru polymethakrylové kyseliny a polyethylenoxidu v kyselém prostředí, protože tento systém bude studován v rámci jeho diplomové práce.

Pan Šindelka se bakalářské práci věnoval svědomitě, pracoval samostatně a během práce se hodně naučil. Zdokonalil se v programování, zpracovávání výsledků i jejich grafickém znázorňování. Výsledkem je kvalitní práce, kterou navrhuji hodnotit známkou výborně.

V Praze 25. 5. 2011

Doc. Ing. Zuzana Limpouchová, CSc.
školitelka